



TITLE:

量子古典対応とデコヒーレンス(第5回『非平衡系の統計物理』シンポジウム)

AUTHOR(S):

鎮目, 浩輔; Habib, S.

CITATION:

鎮目, 浩輔 ...[et al]. 量子古典対応とデコヒーレンス(第5回『非平衡系の統計物理』シンポジウム). 物性研究 1999, 71(5): 895-901

ISSUE DATE:

1999-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96560>

RIGHT:

量子古典対応とデコヒーレンス

鎮目浩輔（図書館情報大）、S.Habib（ロスアラモス研究所）

要旨

量子力学から古典力学を導く方法としてしられている2つの方法： \hbar を小さくすることと、デコヒーレンスを入れる方法、の2つについて、その効果を数値計算を用いて定量的に調べた。系としては作用/ \hbar が600程度のものを調べ、量子力学的平均値と古典力学でのアンサンブル平均、およびWigner関数と古典確率密度を比較した。その結果、次を得た：作用/ \hbar が大きい系では古典と量子で平均値の差はオーダーとして \hbar に比例して小さくなる。デコヒーレンス（ノイズ）を与えると量子的平均値と古典的平均値は非常に近づき、さらにWigner関数と古典分布関数自身の形もよく似てくる。ただし量子でも古典でもノイズにより平均値が大きく変わり、その結果として双方が近い値をとることになる。

1 はじめに

巨視的物体の運動は古典力学によって支配されるが、巨視的物体を構成する原子は微視的世界の運動法則である量子力学によって支配される。したがって古典力学を量子力学から導き出すという問題は基本的で重要である。この問題は次のように2つに分けられる。

1) ある系に古典力学と量子力学を単純に適用した場合、時間発展はどの程度異なるか。

その違いは系のどのような性質で決まるか。

2) 系のスケールを巨視的にすると、その違いがなぜ消えるか。

もし1)でもともと違いがないなら2)は考える必要はないわけである。本研究はこれらの問題を目的として、まず1)を調べるのため、ある系で量子力学的な時間発展と古典力学的な時間発展を数値計算で求め、比較する。さらに2)のために、 \hbar を小さくすることと系にデコヒーレンスを与えることの2つを行い、それぞれの効果をやはり数値的に見る。

量子力学と古典力学では基本概念自身が違うため、何と何を比較するかということ自体が問題である。ここでは系の時間発展に注目し、同じ初期条件から出発した場合に量子と古典で発展がどのように違うかを問題とするのであるが、この問題についてよく知られた議論の一つにEhrenfestの定理がある。これは量子力学に従って運動する波束での座標の量子力学的平均値 $\langle x \rangle_q$ と古典力学に従う一粒子の座標 x_c を比較して、両者が一致するための条件を示している。しかしBallentine(1994)はEhrenfestの定理は不十分であることを示した。彼は $\langle x \rangle_q$ と比較すべきは古典的な1粒子の座標 x_c ではなく、多数の古典粒子からなる集団上でとるアンサンブル平均 $\langle x \rangle_c$ であると主張した。そしていくつかの系で数値計算をおこない、 $\langle x \rangle_q$ と x_c が大きく異なった後でも、 $\langle x \rangle_q$ と $\langle x \rangle_c$ は長い時間にわたって近い値を取ることを数値計算で示した。そこでここでもそれに従い、量子平均と古典アンサンブル平均を比較することにする。ただし平均値だけでなく運動量 p の平均値や x や p のモーメント等の比較もする。さらに、量子論的な分布関数の一種であるWigner関数(Hillery 1984)と古典確率密度(Liouville方程式に従うもの)の比較も行う。よく知られているようにWigner関数は負の値もとるため古典確率密度との比較は問題があるが、少なくとも両者が同じになれば、それは x と p のモーメントがすべての次数に

渡って一致することを意味する。

2 比較の方法

ここでは何を計算してどう比較するかを述べ、実際の計算については次の章で述べる。

1) 初期条件 初期条件は、量子と古典で同じにとらなければならない。「同じ」の意味を、上と同様にすべての次数のモーメントが一致する、ととるならば古典分布関数 f_c とWigner関数 f_w を同じ形にとればよいが、任意の分布関数がWigner関数として適当なわけではない(Wigner関数は密度行列から作られなければならないが任意の関数に対してそれをWigner関数とする密度行列が存在するわけではない)。しかし、幸いガウス分布に関しては、それをWigner関数とする密度行列が存在する。そこで、初期分布は古典、量子ともに次のガウス分布にとる：

$$f_w(t=0) = f_c(t=0) = \frac{1}{\pi\sigma\hbar} \exp\left[-\frac{(x-x_i)^2}{2\delta x^2} - \frac{(p-p_i)^2}{2\delta p^2}\right],$$

ただし、 $\delta x \delta p = \sigma \hbar / 2$ が成り立つとする。ここで σ は状態の混合の度合いをあらわすパラメータで、 f_w に対応する密度行列を ρ とすると $\sigma = (\text{Tr} \rho^2)^{-1}$ の関係にあり、 $\sigma = 1$ なら純粋状態、 $\sigma > 1$ なら混合状態になる。 $\delta x, \delta p$ はそれぞれ波束の x 方向、 p 方向の広がり、 x_i と p_i は波束の中心である。

2) 運動方程式 時間発展を解くための方程式は、量子の場合Schrodinger方程式であるが、ここでは初期状態として混合状態も扱うのでWigner関数の運動方程式

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} \frac{p}{m} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p}\right] f_w + Q_c, \quad \text{ただし } Q_c = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^{2n} (-1)^n}{2^{2n} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} V}{\partial x^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1} f_w}{\partial p^{2n+1}}$$

も解く。本論文で扱うポテンシャル V はたかだか4次の多項式なので、量子補正項 Q_c は項が一つだけになる。古典の運動方程式は原理的には上の式から Q_c を取り除いたLiouville方程式を解けばよいが、これは分布関数の構造が非常に微細になっていくため数値的解法は困難が伴う。そこで初期分布から多数の初期条件をサンプリングし、それらについて独立にNewton方程式を解き、平均等を求める。

3) 古典極限

ある \hbar で量子と古典の差を求めた後、 \hbar を小さくしてその差がどう変わるかをみたい。しかし \hbar は初期分布にも現れるため、たとえば最小波束に保ちつつ \hbar を小さくすれば初期分布は小さくなっていく。このようにすると $\hbar \rightarrow 0$ の極限は特異になることが知られている(例えば、Takahashi 1989)。そこでここでは初期分布を不変に保ちつつ \hbar を小さくする。ガウス分布に \hbar は必ずと σ との積の形でのみ現れるので、これは \hbar を小さくしつつも σ を大きくして $\hbar\sigma$ を一定に保つことを意味する。つまり分布は不変に保ちつつ、状態の混合度を上げていくことになる。

4) デコヒーレンス

上記は純粋な発展、つまりノイズが入らない場合の時間発展である。デコヒーレンスを起こすためにノイズを入れた場合の量子的発展は高温極限では上の項に拡散項を入れた量子

Fokker-Planck方程式

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} \frac{p}{m} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} + D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] f_w + Q_c$$

により記述される (Caldeira 1983)。ただしここでは散逸よりも拡散の効果に興味があるので拡散項は落としている。古典の場合はこれから Q_c を取り除いた Fokker-Planck 方程式を解けばよい。

5) 最後に比較する系である。Ballentine は量子と古典の一致を強調してるが、よく知られてるように、干渉効果が大きいと量子と古典の違いは大きくなるはずである。そこで干渉を起こすため、2重井戸ポテンシャルをとり、中心の不安定点ちかくから波束を出発させる。こうすると波束は2つにわかれてた後、また中心に戻り衝突して干渉しあうことになる。そして以下に示すように、 $\langle x \rangle_q$ と $\langle x \rangle_c$ が大きく離れる。そこで \hbar を変え、またデコヒーレンスを加えて、2つの平均値の差がどう変わるかを見る。なお比較のため、作用/ \hbar が1程度の系をとり同じ計算をしているのでその結果にも簡単に触れる。

3 系と計算結果

ここで詳しく説明する系は、ポテンシャルが2重井戸

$$V = 0.5x^4 - 10x^2$$

で与えられる系で、初期条件は

$$x_i = 0.05, p_i = 0, \quad \delta x = 0.1, \delta p = 0.5, \sigma \hbar = 0.1.$$

とする。この場合、系の「古典度」を示す作用/ \hbar は600程度になる。

1) 古典力学と量子力学を「単純に」適用した場合

上記の初期条件で Schrodinger 方程式を解いて得られた $\langle x \rangle_q$ と多数のニュートン方程式を解いて得られた $\langle x \rangle_c$ を Fig. 1(a) に示す。この図からわかるのは次のことである：

- ・波束が別れてからまたぶつかる時点ではっきりした差が生じる。
- ・ \hbar を減らすにつれて差も減少していく。

差自身をプロットしたのが Fig. 1(b) である。差の最大値はほぼ $1/\hbar$ で減少することが分かる。

次に Wigner 関数 $f_w(x, p)$ と古典的な粒子の分布を比較する。Fig. 2(a) が $t=1$ での Wigner 関数 $f_w(x, p)$ 、Fig. 3(a) が同じ t で古典粒子の分布である（一つの点が $t=1$ での一つのサンプルの座標をあらわす。両図の (b) は、 $t=3.5$ でのそれぞれである。これよりわかるように、両者は非常に異なるという点で高橋の結果 (Takahashi 1989) と一致する。Wigner 関数の特徴は速い振動であるが、これは量子的な干渉によるものである。また注目すべきは、 $t=2$ ではまだ平均値には違いが現れていないのに、それ以前の $t=1$ ですでに分布関数（古典分布関数と Wigner 関数）は非常に異なっている、ということである。逆に言うと、分布関数が異なっても平均値は違っていないとは限らない、ということである。ここでは Takahashi が主張するように両方の分布関数を粗視化することにより違いがある程度小さくなると推測される。しかし $t=3.5$ では平均値が大幅に異なることから、分布自身も粗視化では消せない違いが存在することになる。

2) デコヒーレンスを加えた場合

次にこの系にノイズを加えてデコヒーレンスを起こした場合である。Fig.4に平均値の時間変化を示す。qu-noisy, cl-noisyとラベル付けされた線がそれぞれ量子でデコヒーレンスのある場合、古典でノイズがある場合である。比較のために、Fig.1の古典的平均値と $\hbar=0.1$ の場合の量子的平均値もそれぞれcl-quiet, qu-quietとラベル付けして並べてある。この図から次の事が分かる

- ・古典と量子で平均値の差が非常に小さくなっている。
- ・qu-quietとqu-noisyを比べると大きく異なっている。一方、cl-quietとcl-noisyを比べても同じことがいえる。つまり、古典でも量子でもノイズは平均値を大きく変える。そして変わった結果の値が互いに近くなっている。
- ・ノイズの影響が大きく異なり始めるのは、ちょうどデコヒーレンスなしの古典と量子の平均値が違い始めるあたりでもある。

次にこの場合の、 $t=3.5$ における古典分布関数とWigner関数をそれぞれFig.5とFig.6に示す。Wigner関数の干渉部分が消え、両者がよく似ていることがわかる。

4 まとめ

以上をまとめると次のとおり：

デコヒーレンス無しの場合、 $\langle x \rangle_q$ と $\langle x \rangle_c$ は確かに干渉を起こすあたりで大きく異なる。その差はおおざっぱに言ってプランク定数の逆数で小さくなる。また古典分布関数とWigner関数を比べると、平均値が異なる前に、すでに干渉により違った様相を見せる。

デコヒーレンスを起こすと差は小さくなるが、起こす前の値からも大きく変化する。量子でも古典でもこの点は変わらない。つまり、どちらがよりノイズに強い、ということはない。また古典分布関数とWigner関数自身がよく似てくるという点でデコヒーレンスは量子古典対応を非常に良くすると言える。

なお作用/ \hbar が小さい系として $V=x^4/4$ をとり、初期条件として

$x_i=0.2, p_i=0, \delta x=0.1, \delta p=0.1$ をとって同様の計算を行い、その結果次を得ている：

- ・デコヒーレンスがない場合、 $\langle x \rangle_q$ と $\langle x \rangle_c$ の差は \hbar を小さくするにつれ（上記の系とは異なり） \hbar よりも速く小さくなる。
 - ・デコヒーレンスを与えても量子-古典の差はなかなか小さくならない。
- 上記の系のように小さくするには、元の運動が跡形もなく変わるほど大きなノイズを与えるなければならない。分布関数に関しても同様で、似た形にするのは大きなノイズを与える必要がある。これは、系のサイズに比較してWigner関数の振動が細くないためと考えられる。

今後の課題は、まず上の結果が一般的なものかどうかを調べるために他の系での計算や解析的な分析が必要である。次に、量子でも古典でもノイズより期待値が同程度に変わるという結果を得た。これは、量子では干渉が重要であり、それは古典分布よりもノイズに対して弱いという直観に反する。しかしこれはあくまで一粒子について得られた結果であり、複数の粒子が量子相関を持つ場合、たとえばEPR状態などの場合について調べるのが興味深い。

謝辞

この研究の数値計算はロスアラモス研究所Advanced Computer LaboratoryのCM5を使って行われました。

文献

Ballentine 1994: L.E. Ballentine et al., Phys. Rev. A **50** ('94) 2854

Caldeira 1983 : A.O. Caldeira and A.J. Leggett, Physica A **121**, (83) 587

Hillery 1984: M. Hillery et al., Phys. Rep. **106**, ('84) 121

Takahashi 1989: K. Takahashi, Theor. Phys. Supp. **98** ('89) 109

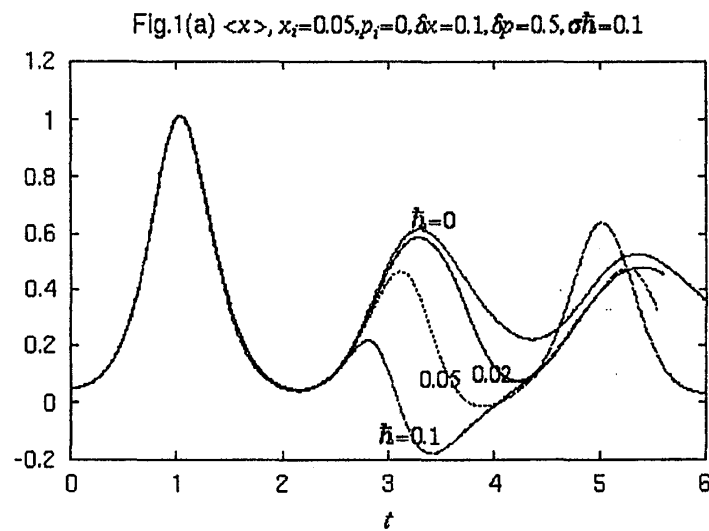


Fig.1(a) 古典、および $\hbar=0.1, 0.05, 0.02$ に対する量子的な $\langle x \rangle$

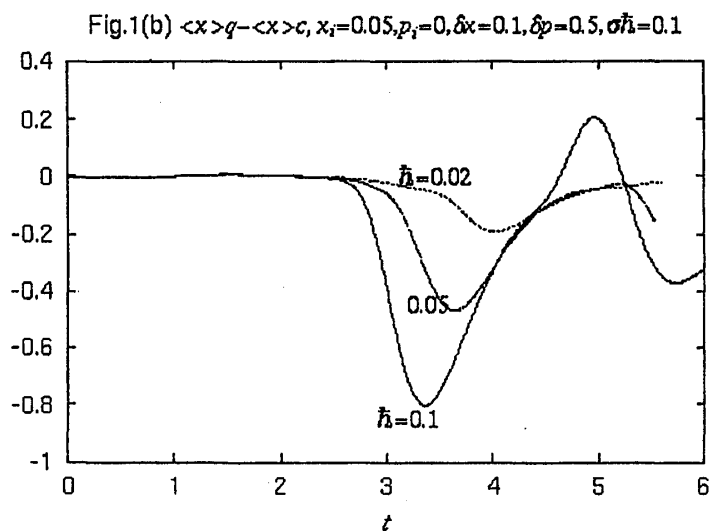


Fig.1(b) $\langle x \rangle_q - \langle x \rangle_c$ ただし $\hbar=0.1, 0.05, 0.02$ 。

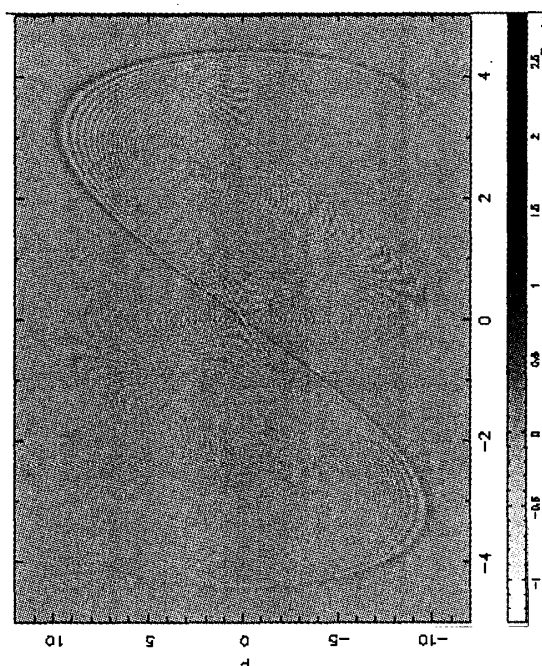


Fig.2(a) $t=1$ のWigner 関数

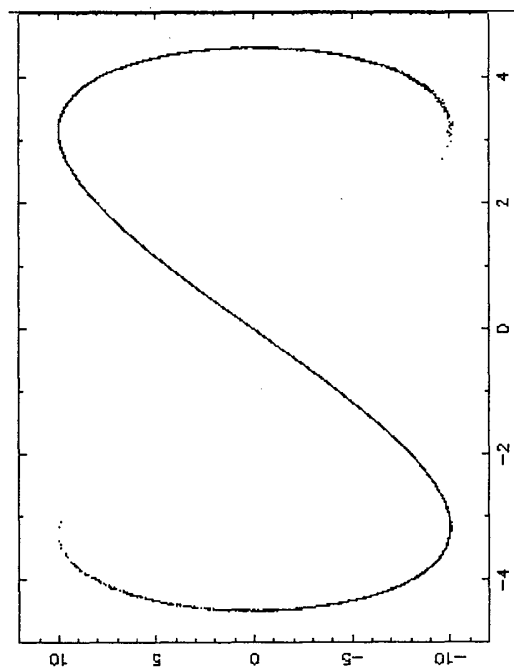


Fig.3(a) $t=1$ の古典的粒子の分布 (各点が1つの粒子の座標を表す)

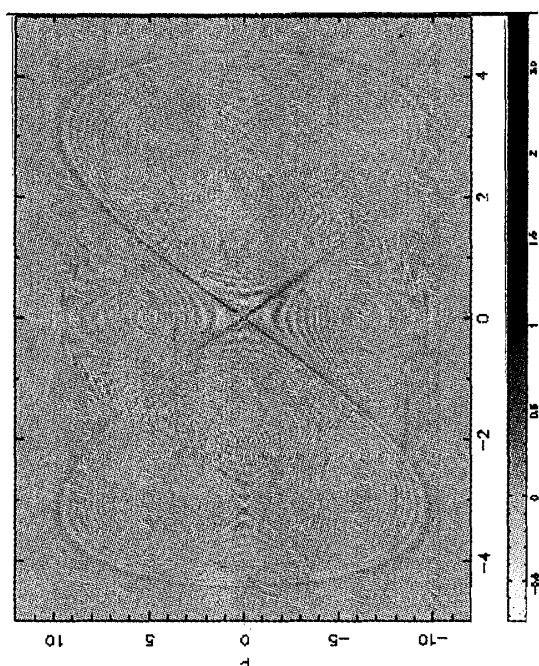


Fig.2(b) $t=3.5$ のWigner関数

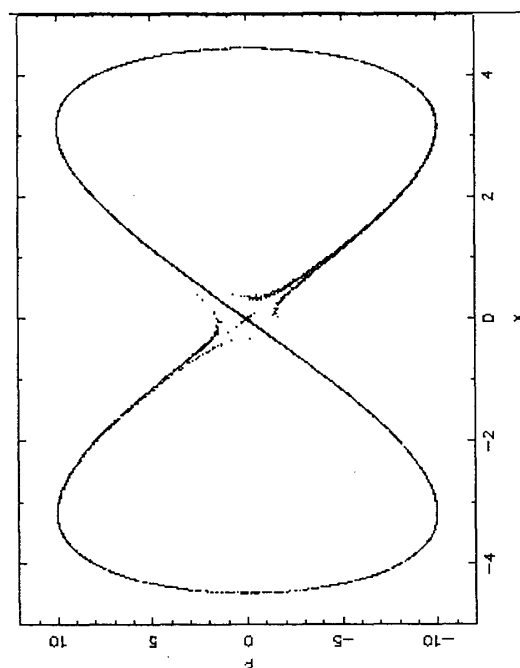


Fig.3(b) $t=3.5$ の古典的粒子の分布 (各点が1つの粒子の座標を表す)

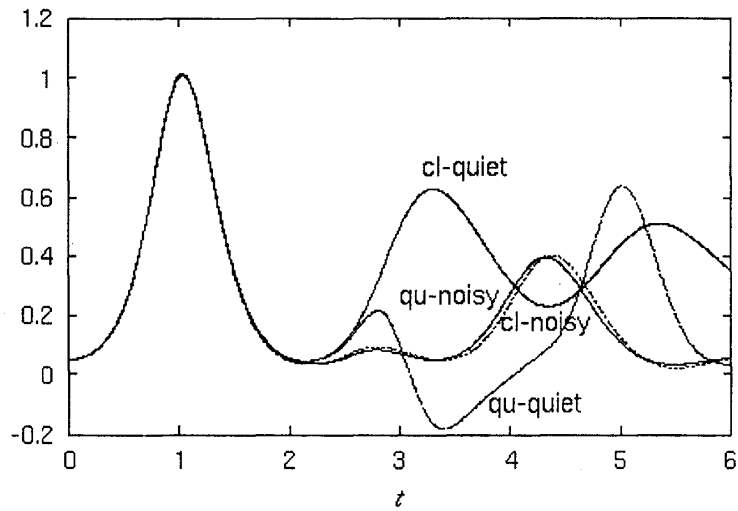


Fig.4 古典、および量子的な $\langle x \rangle$ 。-quietがついているものはFig.1の $\hbar=0.1$ と同じ。-noisy とあるものが、Decoherenceあるいはノイズを受けている場合。

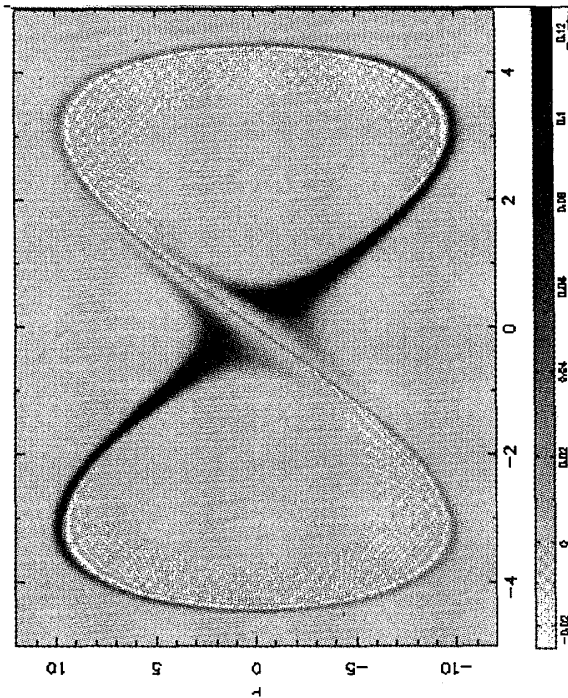


Fig.5 $t=3.5$ における、Decoherenceを受けたときのWigner関数

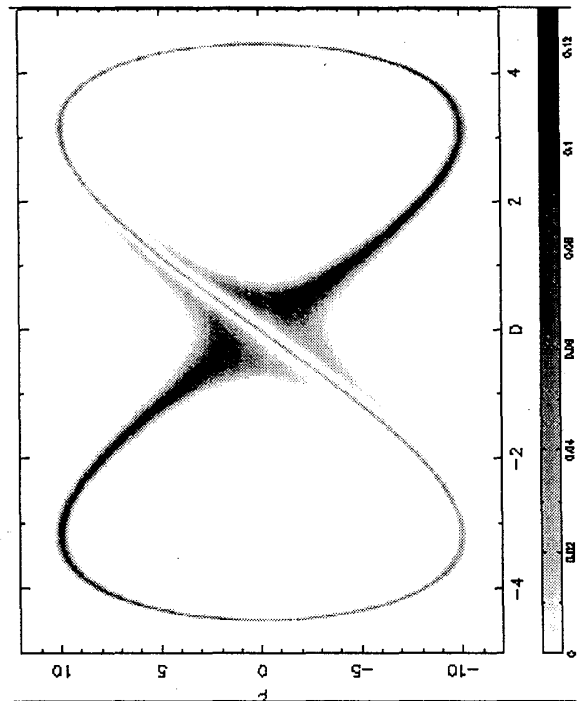


Fig.6 $t=3.5$ における古典確率密度。Noiseを受けた場合。